



Couplage par composants logiciels de codes d'hydrogéologie

Jocelyne Erhel, Philippe Ackerer, Jean-Raynald de Dreuzy, Michel Kern,
Hugues Leroy, Christian Pérez

► To cite this version:

Jocelyne Erhel, Philippe Ackerer, Jean-Raynald de Dreuzy, Michel Kern, Hugues Leroy, et al.. Couplage par composants logiciels de codes d'hydrogéologie. École GRID 2002, 2002, Aussois, France. hal-01316192

HAL Id: hal-01316192

<https://inria.hal.science/hal-01316192>

Submitted on 20 May 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

École d'hiver GRID 2002:
*Calcul Distribué, Méta-Computing, Globalisation des
Ressources*

Comité d'organisation :

- **Responsable :** Emmanuel JEANNOT, LORIA, Nancy
- Jens GUSTEDT, LORIA, Nancy
- Jean-Louis PAZAT, IRISA-INSA, Rennes
- Stéphane VIALLE, SUPELEC, Metz

Chapitre 1

Couplage par composants logiciels de codes d'hydrogéologie

Jocelyne Erhel (INRIA-Rennes), Ph. Ackerer (IMFS-Strasbourg),
J-R. de Dreuzy (CAREN-Rennes), Michel Kern (INRIA-Rocquencourt),
H. Leroy (INRIA-Rennes), C. Perez (INRIA-Rennes)

1.1 Introduction

Les transferts de fluides et de solutés dans les milieux souterrains sont au centre de nombreuses problématiques énergétiques et environnementales. Des problèmes apparus récemment concernent la contamination des aquifères par des polluants, l'intrusion d'eau salée dans les aquifères et le stockage profond des déchets nucléaires. Ils ont fait apparaître l'importance de phénomènes physico-chimiques complexes.

Pour la contamination des aquifères, le devenir d'un polluant dépend à la fois de la physique des écoulements et de la réactivité chimique du polluant. Ces deux phénomènes physiques et chimiques sont en eux-mêmes complexes et sont par conséquent traités traditionnellement séparément, malgré la connaissance de couplages importants. Dans un sens la réactivité chimique détermine les propriétés physiques. Par exemple, les réactions de précipitation et de dissolution modifient les propriétés hydrauliques du milieu. À l'extrême, les réactions de dissolution dans les milieux karstiques transforment un milieu poreux faiblement perméable en un milieu très perméable où les écoulements sont très rapides et éventuellement turbulents. Dans l'autre sens, la physique des écoulements influence la réactivité chimique des éléments en solution. Par exemple, la dispersion ou la concentration des écoulements et la large gamme des vitesses d'écoulement conduisent à la sélection des réactions

chimiques et de leur contrôle cinétique ou thermodynamique.

L'intrusion d'eau salée dans les aquifères menace les ressources d'eau douce d'une part importante des populations. La modélisation des mélanges eau douce- eau salée se heurte au premier abord à l'instabilité de l'interface entre l'eau douce et l'eau salée. Il existe un couplage des équations d'écoulement de fluide et de transport de sel [AYM99a, AYM99b]. Dans un sens, l'écoulement conditionne la diffusion de sel de l'eau salée vers l'eau douce. Dans l'autre sens, la concentration de sel détermine la viscosité du fluide et par conséquent l'écoulement de fluide.

Le stockage profond de déchets nucléaires de longue durée de vie est le problème le plus complexe à cause de l'échelle temporelle à considérer (plusieurs dizaines de milliers d'années), du couplage thermo-hydro-mécanique à modéliser et de la qualité de la prédiction demandée. L'introduction des déchets nucléaires induit une élévation de température dans le milieu qui à son tour modifie les propriétés mécaniques et hydrauliques du milieu. Le problème se situe à plusieurs niveaux dans la caractérisation physique des couplages, dans l'influence de l'hétérogénéité sur ces couplages et dans la mise au point de méthodes de simulation numérique adaptées. L'impact croissant du stockage avec la proximité du site de stockage et la méconnaissance du milieu loin du site nécessitent une adaptation du type et de la précision du modèle avec la distance au site. Des modèles déterministes peuvent être utilisés autour du site de stockage, là où les mesures hydrauliques et géophysiques peuvent donner une image précise du milieu. Loin du site, à cause du manque de données, des modèles stochastiques moyens (pas forcément homogènes) devront être utilisés. Le caractère aléatoire traduit l'absence d'une image parfaite du milieu. Les modèles moyens sont des modèles simplifiés de milieu qui retiennent les principaux facteurs entrant dans la détermination des phénomènes physiques étudiés. Au-delà de la mise au point des modèles moyens, l'estimation a priori de leur précision est capitale en ce qu'elle détermine la capacité à évaluer le risque de fuite d'un site de stockage.

Le projet HydroGrid, retenu dans le cadre de l'ACI GRID 2002, a pour but de modéliser des transferts de fluides et de transport de solutés dans des milieux géologiques souterrains ¹. Ce projet réunit des équipes de l'INRIA Rocquencourt (Estime), de l'INRIA Rennes/IRISA (Aladin et Paris), de l'université de Rennes 1 (CAREN) et de l'université de Strasbourg (IMFS).

Les logiciels de simulation pour des applications hydrogéologiques ont des besoins en capacité de stockage et de calcul qui croissent très vite avec le nombre de mailles utilisées pour discrétiser les modèles [HMP⁺ar, HEM⁺ar]. Dans beaucoup de simulations, la taille du domaine de calcul entraîne un nombre de mailles très important. Pour traiter des domaines tridimensionnels avec une résolution suffisante, la capacité mémoire requise serait au moins de l'ordre de dix à cent Giga-octets

¹<http://www-rocq.inria.fr/kern/HydroGrid/HydroGrid.html>

et le temps de calcul serait de l'ordre de plusieurs mois sur une station de travail. Le recours au parallélisme permet d'accélérer les calculs. Après les machines parallèles et les grappes de PC, le développement des réseaux longues distances a fait apparaître la grille, ensemble de machines parallèles et/ou de grappes de PC. Il est ainsi possible d'agréger d'énormes puissances de calcul, notamment pour coupler des modèles physiques.

Notre objectif est d'étudier la modélisation de phénomènes couplés et leur mise en oeuvre sur une grille de calcul, en développant quatre applications. Les deux premiers couplages sont de type physico-chimique et physico-physique (couplage algébrique d'équations). Ils sont appliqués respectivement à la contamination d'aquifères et à l'intrusion d'eau salée. Les deux autres couplages sont géométriques de type multi-domaines ou multi-échelles et sont appliqués au stockage profond de déchets radioactifs, d'une part dans un milieu peu fracturé, d'autre part dans un réseau de fractures.

Nous choisissons une approche par composants logiciels, qui permet d'encapsuler chaque code modélisant un phénomène physique. Les interfaces des composants permettent d'effectuer les échanges de données nécessaires au couplage numérique. L'exécutif PadicoTM garantit un calcul à haute performances sur une grille de calcul avec différents types de réseaux, grâce notamment à un modèle de composants parallèles, qui permet de passer à l'échelle.

1.2 Couplage algébrique

La modélisation du transport réactif (plus spécifiquement le transport de solutés chimiquement réactifs dans les eaux souterraines) nécessite la résolution d'équations qui représentent le couplage entre le transport de soluté (par un processus de type dispersion convection) et les diverses réactions chimiques, telles que les réactions acido-basiques, l'oxydation, les phénomènes de complexation et de précipitation. Le système global, où les équations d'équilibre chimique sont écrites directement dans les équations de transport, est un système fortement non linéaire couplé d'équations aux dérivées partielles et d'équations algébriques. Le projet hydrogrid vise à réaliser ce couplage sur une grille de calcul.

Le déplacement de deux fluides miscibles est modélisé par un système d'équations aux dérivées partielles et d'équations algébriques non linéaire couplé. Il permet de modéliser des situations comme l'intrusion d'eau salée dans l'eau douce. Il est connu que ce modèle peut générer des phénomènes complexes de recirculation dans des situations instables. Il a donné lieu à d'assez nombreux travaux, mais la plus grande partie de ceux-ci concerne les méthodes de discrétisation. Notre objectif est de mettre au point une méthode de couplage des équations et de la mettre en oeuvre sur une grille de calcul.

Après discrétisation en espace et en temps, le système couplé s'écrit schéma-

tiquement, au pas de temps $n + 1$,

$$\begin{cases} f(p^{n+1}, c^{n+1}) = 0, \\ g(p^{n+1}, c^{n+1}) = 0, \end{cases}$$

où f et g sont des fonctions a priori non linéaires.

La résolution des équations est souvent effectuée par une méthode pas-à-pas, qui s'écrit

$$\begin{cases} f(p^{n+1}, c^n) = 0, \\ g(p^n, c^{n+1}) = 0. \end{cases}$$

Les équations sont ainsi découplées et peuvent être résolues simultanément à chaque pas de temps. Toutefois, la convergence ne peut souvent être assurée que par une réduction sévère des pas de temps. Une méthode itérative de type point fixe peut aussi être utilisée, dans laquelle on itère de la façon suivante :

$$\begin{cases} f(p^{n+1,k+1}, c^{n+1,k}) = 0, \\ g(p^{n+1,k}, c^{n+1,k+1}) = 0. \end{cases}$$

Notre objectif est d'étudier également un couplage fort avec une méthode de type Newton et de comparer les différentes solutions.

Une des étapes du projet HydroGrid est de paralléliser la résolution de chacune des équations dans le système couplé. Les calculs sont soit des calculs explicites sur le domaine soit une résolution de système linéaire de dimension finie. Nous considérons donc deux types de parallélisation.

Pour paralléliser des calculs explicites, l'approche classique est de définir une partition du domaine de calcul en sous-domaines. Les calculs sur chaque sous-domaine sont indépendants et les calculs sur chaque frontière font l'objet de communications.

Pour paralléliser la résolution de systèmes linéaires, il existe principalement deux approches : une méthode directe de type méthode multifrontale et une méthode semi-itérative de type sous-domaines, avec là encore décomposition du maillage. Dans le premier cas, une des difficultés est d'interfacer la parallélisation des calculs explicites avec celle du solveur direct. Dans le second cas, une des difficultés est de développer un préconditionnement efficace pour résoudre itérativement le système du complément de Schur sur les frontières de sous-domaines.

1.3 Couplage géométrique

Certains milieux poreux hétérogènes sont traversés par un petit nombre de fractures qu'il est important de modéliser. En effet, les fractures sont les voies préférentielles des transferts des fluides et des solutés dans les milieux souterrains. Une approche efficace est d'utiliser une méthode inspirée de la décomposition de domaines [AJR⁺99b, AJR⁺99a]. La fracture, supposée sans épaisseur mais avec des propriétés

physiques propres, est remplacée par une condition de transmission. En éliminant la pression dans les sous-domaines ainsi définis, on se ramène à un problème d'interface de type non-standard. Cette méthode est très souple, et permet la prise en compte de modèles physiques différents, ou de discrétisations différentes, de part et d'autre des fractures. Notre objectif est d'utiliser les méthodes de sous-domaines pour simuler l'écoulement et le transport dans des milieux hétérogènes avec quelques dizaines de fractures. À chaque sous-domaine correspond un code d'écoulement ou de transport ; ces codes sont couplés par le problème d'interface modélisant l'écoulement ou le transport dans la fracture.

Des recherches récentes ont montré que les massifs rocheux (massifs cristallins et sédimentaires) sont en général fracturés et que les fluides peuvent s'écouler par des réseaux de fractures interconnectées. Les milieux rocheux sont ainsi devenus intéressants autant pour la gestion des ressources en eau que pour la prospection et l'exploitation pétrolières. Une autre problématique à la fois environnementale et énergétique est venue renforcer l'intérêt pour les milieux fracturés : le stockage des déchets nucléaires. Les milieux fracturés sont par nature très hétérogènes et multi-échelles. Les approches d'homogénéisation ne sont pas utilisables. La modélisation numérique offre la possibilité de développer des approches alternatives plus performantes [DDBara, DDBarb, DEar]. Deux difficultés apparaissent lors de la modélisation des propriétés hydrauliques des milieux fracturés : l'hétérogénéité et la tri-dimensionnalité des milieux. L'hétérogénéité induit une forte chenalisation des écoulements à la fois à l'intérieur des fractures et à l'échelle des réseaux. La structure géométrique des écoulements et la complexité du champ de vitesse produisent des variations très importantes des propriétés hydrauliques équivalentes du milieu. Du point de vue numérique, les méthodes proposées par éléments finis et par réseaux de liens équivalents sont respectivement trop lourdes et trop approximatives pour simuler de façon cohérente les écoulements des réseaux de fractures naturels contenant plusieurs centaines de milliers de fractures de toutes tailles. Notre objectif est de mettre au point une méthode numérique qui soit à la fois moins lourde que les éléments finis et plus précise que la méthode des réseaux liens. Cette méthode se sert de l'idée des méthodes multi-échelles et repose sur l'existence de deux niveaux de complexité scindés venant respectivement de la fracture et du réseau. Les écoulements et la dispersivité sont calculés à l'échelle du réseau de fractures en assimilant celui-ci à un réseau de liens. La perméabilité et la dispersivité de chaque lien sont déterminées par la résolution des équations de transfert dans les fractures avec les conditions aux limites obtenues par la résolution effectuée à l'échelle du réseau. Il s'agit donc d'un couplage fractures 2D-réseau 3D. Les calculs sur les fractures sont tous indépendants, tandis que le calcul sur le réseau de liens requiert une résolution de système linéaire.

1.4 Composants logiciels et grille de calcul

Chaque phénomène physico-chimique est modélisé par un code spécifique. Pour simuler numériquement un problème physique couplé, il est souhaitable de laisser ces codes intacts. En effet, les modèles sont discrétisés en espace par des méthodes différentes selon les propriétés physico-chimiques, afin de conserver les invariants, de respecter le principe du maximum, etc. Ensuite, les schémas en temps sont également spécifiques, afin de respecter les échelles temporelles, de conserver les invariants, etc. Enfin, certains logiciels peuvent nécessiter des bibliothèques numériques qui ne sont disponibles que dans certains centres de calcul [SMAJ97]. Afin de pouvoir interfacer simplement et efficacement ces différents codes, nous choisissons une approche par composant logiciel : chaque code est un composant logiciel de l'application qui est couplé avec les autres codes par le biais des interfaces.

Le composant écoulement traite les équations sur la pression et la vitesse, tandis que le composant transport traite les équations sur la concentration et la masse volumique. Le composant chimie traite les équations sur les concentrations. L'application modélisant l'intrusion d'eau salée est un couplage algébrique entre les composants écoulement et transport. Le transport réactif couple les composants transport et chimie. Le stockage de déchets radioactifs couple des composants écoulement de fractures et écoulement de domaines ou réseau de liens. Le couplage des codes se fait par échanges de variables, la procédure d'échange étant fixée par le choix des schémas de discrétisation et des méthodes de couplage numérique.

Prenons l'exemple du couplage écoulement-transport par une méthode pas-à-pas. Les composants écoulement et transport calculent simultanément un pas de temps puis échangent après chaque pas de temps les pressions et les concentrations. Ce couplage doit tenir compte des différentes discrétisations et parallélisations. La grille doit assurer les transferts des pressions et des concentrations, dans les formats requis, à haut débit, avec les synchronisations voulues.

Cette approche du couplage de codes par composants logiciels soulève immédiatement le problème de son adéquation aux grilles de calcul. Les infrastructures logicielles, telles que Globus ou Légion, ne proposent pas l'utilisation de modèles de composant car ils présupposent des courtiers d'objets (ORB pour CORBA ou RMI pour Java) capables de fonctionner dans un environnement de grille de calcul. Le couplage de code est souvent réalisé à l'aide de bibliothèques de messages (comme par exemple MPI) ou de sur-couches logicielles au-dessus de ces bibliothèques (tel que MpCCI). Notre objectif est d'utiliser le courtier d'objets développé dans le cadre de l'ACI GRID RMI ². Ce modèle de composants permet de passer à l'échelle, en encapsulant efficacement des codes parallèles, notamment lors de la composition. Il s'agit par exemple de permettre le transfert d'une matrice ou d'un maillage distribués dans plusieurs espaces d'adressage au sein d'un composant parallèle vers

²<http://www.irisa.fr/Grid-RMI/fr/>

un autre composant parallèle en effectuant éventuellement une redistribution. Un modèle de composant parallèle a été défini sur la base de celui de l'OMG (modèle CCM) [RT99, ACT01]. Un de nos objectifs est d'expérimenter ce modèle pour nos applications numériques.

La mise en oeuvre des applications de couplage sur la grille s'appuie sur l'exécutif PadicoTM [ACT02]. Celui-ci permet à des intergiciels (comme par exemple des implémentations de CORBA) d'exploiter les réseaux disponibles au sein d'une grille de calcul. La grille que nous souhaitons utiliser est constituée de plusieurs grappes de PC disponibles dans plusieurs sites de l'INRIA (Rennes, Grenoble, etc). Ces grappes sont munies de réseaux très variés (Ethernet, SCI, Myrinet, etc). Les grappes de PC sont interconnectées via le réseau VTHD++. Notre objectif est de montrer que nos applications de couplage, fondées sur l'assemblage de composants, sont capables de fonctionner efficacement quelle que soit la configuration de la grille et des ressources allouées pour l'exécution. Le travail consiste à adapter PadicoTM à l'infrastructure logicielle de la grille e-Toile (Globus ou Unicore), de façon à permettre l'exécution des composants sur les ressources offertes par la grille.

Bibliographie

- [AJR⁺99a] C. Alboin, J. Jaffré, J.E. Roberts, X. Wang, and C. Serres. Domain decomposition for some transmission problems in flow in porous media. In C.-H. Lai, P. E. Bjorstad, M. Cross, and O. Widlund, editors, *Numerical Treatment of Multiphase Flows in Porous Media*, pages 22–34. Lecture Notes in Physics, Springer, 1999.
- [AJR⁺99b] C. Alboin, J. Jaffré, J.E. Roberts, X. Wang, and C. Serres. Domain decomposition for some transmission problems in flow in porous media. In C.-H. Lai, P. E. Bjorstad, M. Cross, and O. Widlund, editors, *Eleventh International Conference on Domain Decomposition Methods*, pages 371–379. Domain Decomposition Press, Bergen, Norway, 1999.
- [AYM99a] Ph. Ackerer, A. Younes, and R. Mosé. Modelling variable density flow and solute transport in porous medium : 1. numerical model and verification. *Transport in Porous Media*, 35:345–373, 1999.
- [AYM99b] Ph. Ackerer, A. Younes, and R. Mosé. Modelling variable density flow and solute transport in porous medium : 2. re-evaluation of the salt dome flow problem. *Transport in Porous Media*, 35:375–394, 1999.
- [DDBara] J-R. De Dreuzy, P. Davy, and O. Bour. Hydraulic properties of two-dimensional random fracture networks following a power law length distribution: 1-effective connectivity. *Water Resource Research*, to appear.

-
- [DDBarb] J-R. De Dreuzy, P. Davy, and O. Bour. Hydraulic properties of two-dimensional random fracture networks following a power law length distribution: 2-permeability of networks based on log-normal distribution of apertures. *Water Resource Research*, to appear.
- [DEar] J-R. De Dreuzy and J. Erhel. Efficient algorithms for the determination of the connected fracture network and the solution of the steady-state flow equation in fracture networks. *Computers and Geosciences*, to appear.
- [DPP01] A. Denis, C. Pérez, and T. Priol. Portable parallel corba objects: an approach to combine parallel and distributed programming for grid computing. In *International Euro-Par'01 conference*, Manchester, UK, 2001.
- [DPP02] A. Denis, C. Pérez, and T. Priol. PadicoTM: An open integration framework for communication middleware and runtime. In *CCGRID'02 conference*, Berlin, Germany, 2002.
- [HEM⁺ar] H. Hoteit, J. Erhel, R. Mosé, B. Philippe, and P. Ackerer. Numerical reliability and CPU time for the mixed methods applied to flow problems in porous media. *Journal of Computational Geosciences*, to appear.
- [HMP⁺ar] H. Hoteit, R. Mosé, B. Philippe, P. Ackerer, and J. Erhel. About the maximum principle violations of the mixed-hybrid finite element method applied to diffusion equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, to appear.
- [RP99] C. René and T. Priol. MPI code encapsulation using parallel CORBA object. In *Eighth IEEE International Symposium on High Performance Distributed Computing*, pages 3–10, IEEE, 1999.
- [SMAJ97] P. Siegel, R. Mosé, Ph. Ackerer, and J. Jaffré. Solution of the advection-diffusion equation using a combination of discontinuous and mixed finite elements. *International Journal For Numerical Methods in Fluids*, 24:595–613, 1997.